

Title	Spin Density Waveの研究
Author(s)	山崎, 京子
Citation	大阪大学, 1966, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/1038
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名・(本籍)	山 崎 京 子 やま ざき きょう こ
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	第 8 7 1 号
学位授与の日付	昭 和 41 年 3 月 28 日
学位授与の要件	理学研究科物性学専攻 学位規則第5条第1項該当
学位論文題目	スピン密度波の研究
論文審査委員	(主査) 教授 永宮 健夫 (副査) 教授 国富 信彦 教授 西山 敏之 教授 金森順次郎 教授 吉田 思郎

論 文 内 容 の 要 旨

金属 Cr の結晶において、その磁気構造は 3d 電子のスピンの周期的に配列したいわゆる spin density wave (SDW) をなしている事が実験的に知られている。

この SDW の安定性及び外磁場に対する挙動を理論的に考察する事は重要であろう。SDW がエネルギー的に安定である事は既に副論文 2 の研究で肯定的に解決されている。主論文の研究では、更に SDW に磁場をかけたときの状況の理論的研究を目標とした。

即ち、Exchange Integral U の大きさが適当であると 3d 電子は SDW を安定にするが、これに外磁場をかけると磁場の大きさが或る臨界値を越えると SDW は消滅して、unsaturated ferro (USF) に移行する。SDW が sine 型であるか、serew 型であるかによっても、又 spin の向き $\vec{\sigma}$ と磁場の向き \vec{H} とが互いに直角であるか平行であるかによっても、この臨界磁場の値は異なる。筆者は次の四種の SDW に対して臨界磁場 H の値を計算した。

Screw A (Screw の回転面 $\perp \vec{H}$)

Screw B (Screw の回転面 $\parallel \vec{H}$)

Sin A ($\vec{\sigma} \parallel \vec{H}$)

Sin B ($\vec{\sigma} \perp \vec{H}$)

計算の方針は次の如くである。

まず伝導電子の集団に外磁場 H をかけた時の E_{total} を最小にするような USF の状態を求める。得られた USF を無限小振巾の SDW で modulate し local stability を調べる。

この方針でよく localize した wannier 函数を用いたハートリー・フォック近似によって計算していくと、critical field が定められる。

こうして数値計算した結果を整理すると、 (H, U) を parameter として S DW の出現領域をあらわす phase diagram を描く事が出来る。筆者は $k_F=0.50375, 0.50000, 0.49625, 0.49250, 0.48875, 0.48500$ の六つの k_F の場合について phase diagram を描いた。(但し k_F は磁場がない時のフェルミ球の半径, 単位 $2\pi/a$)

又 $H=0$ のとき, これらを基にして (k_F, U) をパラメータとした phase diagram を作る事が出来る。筆者はこの phase diagram の概形も描いた。

次に上に述べた四種の S DW について安定性の比較を行ない, H が大きいときは Screw A 又は Sine B が常に安定 (この両者の区別はつかない) であるが, H が小さいときは k_F の値によって Sine A の方が安定な場合があることを示した。

以上では有限の磁場を無限小振巾の S DW にかけることを考えたが, 逆に有限振巾の S DW に微小な磁場をかけた場合を考えると S DW の帯磁率の計算が出来る。筆者は S DW の中, 有限振巾の screw 構造について磁場を screw の回転面に垂直にかけたときの帯磁率 (垂直帯磁率) を求め, 常磁性のスピン帯磁率と比較した。平行帯磁率についても計算の方針を与え, 数式上の計算を行なったが, 非常に複雑な式となり, 数値計算には簡単には移せないことがわかった。

論文の審査結果の要旨

不完全電子殻に起因する磁気モーメントをもつ原子を構成成分とする結晶の中では, そのモーメントのらせん状配列があるという理論が 1958—59 に吉森らによって提出された。その後間もなく, Overhauser (1959—60) は金属内伝導電子が spin density wave (SDW) を安定な状態としてもつという考えを提出した。この S DW は, 伝導電子系のスピン密度が従来考えられていたようにゼロではなく, 有限で, 場所と共にらせん状あるいは正弦波状に変っているものである。ちょうど吉森らの理論が出たころ, 金属クロームでは, 磁気モーメントの配列がらせん状あるいは正弦波状であるという中性子回折による観測がなされた。その後, 実験が進むにつれて, クロームのモーメント配列は, 吉森らが考えたような, 原子自身をもつ磁気モーメントの配列ではなく, 伝導電子が作る S DW であることを示す証拠が増してきた。しかも, その配列は正弦波状であることが明らかにされた。

しかし, 自由電子ガスのモデルに立脚している Overhauser の S DW は, 未だ理論的に根拠づけられていない。そこで, 立木・永宮および永宮・望月・山崎はクロームのモデルとして, 体心立方格子の単一エネルギー・バンド内にある伝導電子系をとり, 各電子は自由電子というよりはむしろ各原子に強く束縛された電子であるという近似をとって, この電子系がらせん状 S DW を作るかどうかを調べた。但し, 第一ブリルアン域内の電子エネルギー・スペクトルは自由電子状であると仮定した。その結果, 原子内クーロン積分 U とフェルミ球の半径 k_F の値がある限られた範囲内であれば, S DW が安定な状態として存在し, しかもその S DW は金属クロームに存在する S DW に近い波数もっているということが示された。この研究の中で山崎は電子計算機その他によって数値計算を勢力的に行ない, これがこの学位論文の副論文となっている。

主論文は、外磁場が存在するときの、上記モデルに基づくSDWを研究したものである。しかし、この問題を研究しつくすことは非常に困難であるので、SDWの振巾が小さい場合と、振巾は有限であるが磁場が小さい場合の二つを取扱い、特に後者については、らせん状SDWのスピンの回転面に対して磁場が垂直である場合だけを扱った。その結果、次の結論がえられた。1. 十分大きい磁場の下ではSDWは存在せず、一定のスピンの密度の状態、即ち強磁性状態が安定である。2. 磁場をなくしたときにSDWが安定状態として存在するようUと k_F の値の範囲では、磁場を下げて行くと、ある臨界磁場 H_c に達したとき、SDWが発生する。3. H_c は発生するSDWの種類によって異なり、磁場に垂直に回転するらせん状SDWまたは磁場に垂直に振動する正弦波状SDWの場合には H_c は最も高く、磁場の方向を含む面内で回転するらせん状SDWの場合には H_c は次に高く、磁場の方向に振動する正弦波状SDWの場合には H_c は最も低い。従って最も高い H_c を与える第一の場合のSDWだけが発生すると結論される。4. 磁場が小さい場合の垂直帯磁率を計算したが、それは常に常磁性状態の帯磁率よりも小さい。

以上については、定式化を行なった後、くわしい数値計算を遂行し、結果を多数のグラフおよび数表にまとめた。

この研究は金属クロムの磁性を理解する上に助けとなるものであり、また他に同種の研究が一つも発表されていない現状では貴重な文献であるといえよう。従って理学博士の学位論文として適当であると認める。